

Cálculo ejemplo para una solución buffer de ácido láctico/lactato sódico

Para poder realizar el cálculo, necesitamos los siguientes datos:

- Ácido láctico (HA) – *Peso molecular 90.08 g/mol*
- Citrato de sodio (A⁻) – *Peso molecular 112.06 g/mol*

Imaginemos que el valor de pH del producto final es **4.5**.

Conocemos el valor de pKa del ácido láctico, **3.86**.

Teniendo en cuenta que la solución a preparar debe cumplir que pKa debe ser ± 1.0, estamos dentro del rango.

Usamos la aproximación HH:

$$\text{pH} = \text{pKa} + \log \left(\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}\right)$$

Sustituimos los valores conocidos sobre la aproximación:

$$4.5 = 3.86 + \log \left(\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}\right)$$

Aislamos el valor **log**:

$$4.5 - 3.86 = \log \left(\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}\right)$$

$$0.640 = \log \left(\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}\right)$$

Para conocer el valor que representa **[A⁻]/[HA]**, introducimos en una calculadora científica el valor **0.640** y aplicamos la función **10^x** (de esta manera eliminamos el log).

Entonces tenemos que **[A⁻]/[HA] = 4.365**

Este dato nos indica que la concentración molar del lactato de sodio, será 4.365 veces mayor que la del ácido láctico (siempre que el ácido láctico sea al 100%).

El siguiente paso es calcular el número de moles correspondiente a cada componente a partir de su peso molecular:

Peso molecular ácido láctico = 90.08 g/mol

1 mol ácido láctico = 90.08 gramos

1 gramo ácido láctico = 0.01110 moles ácido láctico

Estos datos se obtienen mediante estequiometría:

$$1 \text{ gramo ácido láctico} \times \frac{1 \text{ mol ácido láctico}}{90.08 \text{ gr ácido láctico}} = 0.01110 \text{ moles ácido láctico}$$

Peso molecular lactato sodio = 112.06 g/mol

1 mol lactato sodio = 112.06 gramos

1 gramo lactato sodio = 0.008924 moles lactato de sodio

O bien:

$$1 \text{ gramo lactato sodio} \times \frac{1 \text{ mol lactato sodio}}{112.06 \text{ gr lactato sodio}} = 0.008924 \text{ moles lactato sodio}$$

Sabemos que necesitamos **[A⁻]/[HA] = 4.365** para un pH final de **4.5**.

Para 100 gramos de producto, imaginemos que usamos 1 gramo de lactato sodio y 1 gramo de ácido láctico (siendo este al 100%).

Realizamos la siguiente relación:

$$\frac{[\text{A}^-]}{[\text{AH}]} = \frac{1 \times 0.008924}{1 \times 0.01110}$$

$$\frac{[\text{A}^-]}{[\text{AH}]} = 0.804 \quad \text{Es un valor muy alejado del deseado que es 4.365.}$$

Manteniendo 1 gramo de ácido láctico, determinamos la concentración de lactato sodio, a través de la incógnita **B**:

$$\frac{[\text{A}^-]}{[\text{AH}]} = \frac{\text{B} \times 0.008924}{1 \times 0.01110}$$

$$4.365 = \frac{\text{B} \times 0.008924}{1 \times 0.01110}$$

$$0.0484515 = \text{B} \times 0.008924$$

$$\frac{0.0484515}{0.008924} = \text{B}$$

$$\text{B} = 5.429$$

Si usamos entonces 5.429 gramos de lactato sodio y 1.0 gramo de ácido láctico (al 100%), comprobamos que:

$$\frac{[A^-]}{[AH]} = \frac{5.529 \times 0.008924}{1 \times 0.01110}$$

$$\frac{[A^-]}{[AH]} = 4.445 \text{ Es un valor más próximo al que necesitamos}$$

Como resumen podemos afirmar que:

Para obtener un pH quelado de 4.5 usando la solución ácido láctico/lactato sodio, se añaden 5.429 veces de lactato sodio, comparado a la proporción de ácido láctico al 100%.

Si el ácido láctico se encuentra en una concentración del 80%, ajustamos a:

1.25 gramo ácido láctico (al 80%)
5.429 gramos lactato sodio

La concentración de solución que se suele usar por defecto suele llegar a un 2% sobre el total de la formulación. Aproximando al 2%*, entonces:

0.37 gramos de ácido láctico (al 80%)
1.63 gramos de lactato sódico

* Sumamos 1.25 ácido + 5.429 lactato, que es igual a 6.679
Dividimos 2 entre 6.679, siendo el resultado de 0.299.
Multiplicamos 0.299 tanto para el ácido como para el lactato.